

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ InSb-GaSb, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЛАВКИ

П.Г.АЖДАРОВ, С.М.БАГИРОВА, З.А.АГАМАЛИЕВ, В.В.МИР-БАГИРОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана,
AZ 1143, ул.Баку, пр. Г.Джавида, 33*

Решена задача концентрационного распределения компонентов в кристаллах InSb-GaSb, выращенных методом зонной плавки с учётом сложного изменения коэффициента сегрегации компонентов с составом расплава. Рассчитаны концентрационные профили компонентов вдоль кристаллов, выращенных из слитков InSb-GaSb с различным составом. Показано, что полученные результаты определяют оптимальные условия для выращивания кристаллов InSb-GaSb с заданным однородным и переменным составами.

Важность исследований полупроводниковых твёрдых растворов бинарных систем определяется возможностью управления фундаментальными параметрами кристалла путём изменения соотношения компонентов. Известно, что квазибинарные твёрдые растворы InSb-GaSb относятся к разряду перспективных материалов как в научном, так и в прикладном аспектах. Исследования диаграммы фазового состояния показали, что составные компоненты этой системы полностью растворяются друг в друге в любых соотношениях [1]. Существенное различие в ширинах запрещённых зон GaSb (~0,80эВ) и InSb (~0,23эВ) открывает возможность прецизионного управления величиной этого фундаментального параметра в кристаллах GaSb-InSb путём простого изменения состава матрицы.

В настоящей работе проведено математическое моделирование распределения компонентов в монокристаллах твёрдых растворов InSb-GaSb, выращенных методом зонной перекристаллизации. Цель - установление возможностей метода зонной перекристаллизации для выращивания кристаллов InSb-GaSb с заданным переменным и постоянным составами. Заметим, что аналогичные задачи были решены ранее для системы кремний-германий, результаты которых показали хорошее согласие с экспериментальными данными для кристаллов, выращенных как консервативными, так и неконсервативными методами [2-9].

На Рис.1 представлена схема выращивания кристаллов твёрдых растворов методом зонной перекристаллизации, заложенная в основу математического моделирования распределения компонентов в кристаллах InSb-GaSb. В тигель над монокристаллической затравкой из более тугоплавкого компонента (GaSb), закладывается предварительно изготовленный макрооднородный поликристаллический стержень заданного состава из InSb-GaSb. В нагревателе с аксиальным температурным полем с характеристикой, указанной на Рис.1, производится расплавление части слитка InSb-GaSb над затравкой. В предстартовый момент температура на границах расплава с затравкой и слитком равна температуре ликвидуса заданного состава слитка InSb-GaSb. Рост кристалла происходит на затравке с момента включения механизма перемещения тигля вниз и продолжается до полной перекристаллизации слитка.

Математическую задачу распределения компонентов в кристалле, выращенном в вышеуказанном режиме, решали в пфанновском приближении при выполнении следующих стандартных условий [10]: в расплаве отсутствует испарение и разложение составных компонентов; скорости диффузии молекул InSb и GaSb в расплаве достаточно высоки и обеспечивают равномерность состава по всему объёму; в процессе роста диффузия компонентов в твёрдой фазе

пренебрежимо мала; на фронте кристаллизации существует равновесие между жидкой и твёрдой фазами, определяемое диаграммой фазового состояния системы; коэффициент сегрегации GaSb изменяется с составом расплава в соответствии с диаграммой фазового состояния системы InSb-GaSb; фронт кристаллизации плоский; состав начального поликристаллического слитка макроднороден.

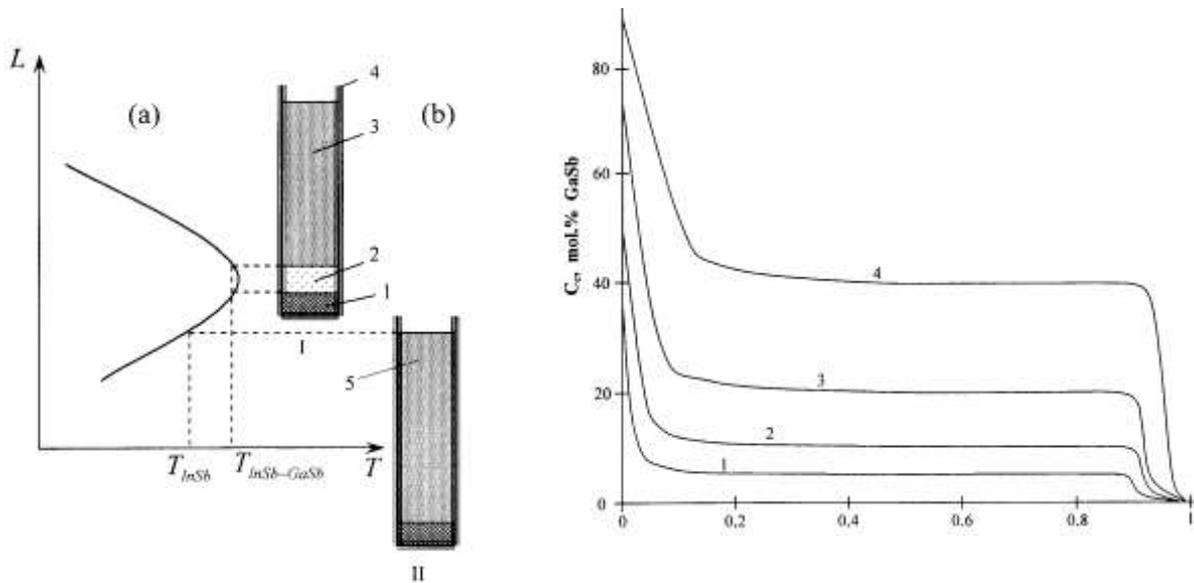


Рис.1.

Температурный профиль в нагревателе (а) и схема выращивания кристаллов InSb-GaSb методом зонной перекристаллизации (b): 1–затравка из GaSb, 2–расплав InSb-GaSb, 3–макроднородный стержень InSb-GaSb, 4- тигель, 5– кристалл InSb-GaSb; I–стартовая позиция кристаллизации, II–полное завершение процесса перекристаллизации.

Рис.2.

Расчётные концентрации GaSb вдоль кристаллов InSb-GaSb, выращенных методом зонной плавки. Длина расплавленной зоны $Z=L/10$. Стартовый состав слитков InSb-GaSb: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 20 и 4 – 40мол.% GaSb.

Введём следующие обозначения: V_m^0 и V_m - объёмы расплавленной зоны в начальный и текущий моменты; C_c , C_i , C_m - концентрации (доли) молекул второго компонента (GaSb) в кристалле, начальном слитке и расплаве, соответственно; C_m^0 - концентрация второго компонента в расплавленной зоне в начальный момент; C – общее количество GaSb в расплаве; V_c – объём расплава, кристаллизующийся в единицу времени; V_i – объём слитка InSb-GaSb, расплавляющийся в единицу времени; $K = C/C_m$ – равновесный коэффициент сегрегации GaSb; L , l , и Z – длины начального слитка, перекристаллизовавшейся части слитка и расплавленной зоны, соответственно.

По условию задачи считаем, что скорость кристаллизации расплава V_c не зависит от времени, и тогда в принятых выше обозначениях имеем

$$C_m = \frac{C}{V_m}; \quad \frac{dC_m}{dt} = \frac{C V_m - V_m C}{V_m^2}, \quad (1)$$

$$V_m = V_m^0 - (V_c - V_i)t. \quad (2)$$

Считаем, что до конечной расплавленной зоны Z и V_i , как и V_c , не зависят от времени. Тогда на участке слитка длиной $L-Z$ справедливы следующие соотношения

$$V_m = V_m^0, \quad C_m^0 = C_i \quad \text{и} \quad \dot{C} = V_c C_m K + V_i C_m^0. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), после разделения переменных и интегрирования, имеем

$$\int_{C_m^0}^{C_m} \frac{dC_m}{C_m^0 - C_m K} = \frac{V_c}{V_m^0} = \frac{l}{Z}. \quad (4)$$

Уравнение (4) определяет состав кристалла по его длине l на участке L-Z. С момента образования конечной расплавленной зоны имеем

$$V_m = V_m^0 - V_c t, \quad \dot{V}_m = -V_c, \quad \dot{C} = -V_c C_m K. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (1) после интегрирования получим

$$\int_{C_{mf}^0}^{C_m} \frac{dC_m}{C_{mf}^0 - C_m k} = \ln \frac{V_m^0}{V_m^0 - V_c t}, \quad (6)$$

здесь C_{mf}^0 - стартовая концентрация второго компонента в последней расплавленной зоне. Обозначив долю закристаллизовавшегося расплава $V_c t / V_m^0$ символом γ , уравнение (6) запишем в следующем виде

$$\gamma = 1 - \exp \left[- \int_{C_m}^{C_{mf}^0} \frac{dC_m}{C_m K - C_m} \right]. \quad (7)$$

Решение интегралов в уравнениях (4) и (7) требует знания аналитической зависимости коэффициента сегрегации K от состава расплава C_m . Для рассматриваемой нами системы $In_{1-x}Ga_xSb$ K второго компонента изменяется сложным образом от состава в интервале $\sim 10.4 \div 1$ [1] и не описывается аналитическим уравнением. В данном случае значения интегралов в (4) и (7) можно определить численным методом, определяя значения K для сопряжённых значений C_m по диаграмме фазового состояния системы $In_{1-x}Ga_xSb$ [1].

На Рис.2 для примера представлены характерные кривые концентрационного распределения компонентов в слитках InSb-GaSb, рассчитанные из уравнений (4) и (7) численным методом для четырёх различных значений C_i . В расчётах принято, что $Z=L/10$. Как видно из Рис. 2 во всех случаях концентрация GaSb максимальна в начале слитка и затем, уменьшаясь, доходит до однородного значения с $C_c=C_i$. В конце слитка концентрация второго компонента снова начинает падать и доходит практически до нуля при $l=L$. Длина конечного участка с переменным составом для всех рассматриваемых композиций слитков равна ширине расплавленной зоны Z . Протяжённость начального участка с переменным составом зависит от состава исходного слитка, что связано с изменением K с составом расплавленной зоны. Скорость изменения состава вдоль направления кристаллизации на финальном участке расплавленной зоны падает с уменьшением C_i , поскольку длина этой зоны зафиксирована по условию задачи.

Семейство кривых Рис.2 демонстрирует возможности математического моделирования в определении операционных параметров для выращивания кристаллов твёрдых растворов с заданным однородным или переменным составами. На основе вышеизложенных данных и результатов можно сделать следующее заключение. Математическое моделирование распределения компонентов в кристаллах InSb-GaSb, выращенных методом зонной плавки, выполненное с учётом сложной зависимости коэффициента сегрегации компонентов с составом расплава, позволяет произвести оценку оптимальных технологических параметров для получения кристаллов с заданным составом и распределением компонентов.

1. S.C. saur, S.Kou, *J. Crystal Growth*, **249** (2003) 470.
2. G.Kh.Azhdarov, T.Kucukomeroglu, A.Varilci et. al., *J. Crystal Growth*, **226** (2001) 437.
3. I.Yonenaga, *J. Crystal Growth*, **198/199** (1999) 404.

4. I.Yonenaga, *J. Crystal Growth*, (226) (2001) 47.
5. N.V.Abrosimov, S.N.Rossolenko, W Thieme et. al., *J. Crystal Growth*, **174** (1997) 182.
6. П.Г.Аждаров, Н.А.Агаев, *Неорганические материалы*, **35** (1999) 763.
7. С.Marin, A.G.Ostrogorsky, *J. Crystal Growth*, **211** (2000) 378.
8. К. Kadakura, Y.Takano, *J. Crystal Growth*, **171** (1997) 56.
9. D.Bliss, B.Demczyk, B.Anselmo et. al., *J. Crystal Growth*, **174** (1997) 197.
10. В.М.Глазов, В.С.Земсков, *Физико-химические основы легирования полупроводников, Москва, «Наука», (ГОД) 371.*

**ƏRİNTİ ZOLAQ ÜSULU İLƏ ALINAN BƏRK MƏHLULLARINDA
KOMPONENTLƏRİN PAYLANMASININ MODELƏŞDİRİLMƏSİ**

P.Н.ƏJDƏROV, S.М.БАQİROVA, Z.Ə.АĞАМ LIYEV, V.V.MİR BAQİROV

Komponentlərin seqreqasiya əmsalının ərintinin tərkibindən asılılığı nəzərə alınaraq, ərinti zolaq üsulu ilə alınan kristallarda komponentlərin konsentrasiyasının paylanma məsələsi həll edilib. Müxtəlif tərkibli InSb GaSb bərk məhlullardan alınan kristallarda komponentlərin konsentrasiya profilləri hesablanıb. Göstərilib ki, alınan nəticələr InSb GaSb kristallarında verilmiş komponent paylanmasını əldə etmək üçün optimal şərtləri müəyyən edir.

**MODELING OF COMPONENTS DISTRIBUTION IN InSb-GaSb
SOLID SOLUTIONS GROWN BY ZONE MELTING METHOD**

P.G.AZH DAROV, S.M.BAGIROVA, Z.A.AGAMALIYEV, V.V.MIR-BAGIROV

The problem of the components concentration distribution in InSb-GaSb crystals grown by zone levelling technique with consideration for the dependence of the components segregation coefficient on the melt composition has been carried out. Compositional profiles of the crystals grown from InSb-GaSb ingots with various compositions have been calculated. It has been shown that the obtained results define optimum conditions in preparing InSb-GaSb crystals with a desired uniform and graded compositions.

Редактор: М.Алиев